

電子系の動的応答理論

(その3)

東京大学物性研究所 高田康民

§10 (その3)のはじめに

この誌上セミナーの(その1)をお届けしてから(その2)までの間とはほぼ同じ程に長い時間が経過して、この(その3)をお届けすることになりました。自分ながら、なんと筆無精なことかと呆れている次第ですが、どうかご容赦ください。

前回、1電子グリーン関数 $G(r, r'; i\omega_p)$ を求めるということは、取りも直さず、有効一体ポテンシャルである自己エネルギー $\Sigma(r, r'; i\omega_p)$ を決定することであり、しかも、その決定には密度相関関数 $Q_{pp}(r, r'; i\omega_q)$ の要である分極関数 $\Pi(r, r'; i\omega_q)$ が深く関与していることを示した。この意味で、1電子グリーン関数と密度相関関数(あるいは、自己エネルギーと分極関数)はお互いに密接に絡み合っており、そして、その絡み合いの核心を捉えている物理量が3点バーテックス関数 $\Gamma_0(y, z, x; i\omega_p, i\omega_p)$ であることを説明した。ちなみに、この Γ_0 という量が電子の電荷は多電子系においては裸の $-e$ から時間的にも空間的にも変化する有効電荷 $-e^*(\equiv -e\Gamma_0)$ に変化する様子を記述していることになる。

さて、今回、これらの関数を正確に求めるために過去約半世紀にわたって繰り広げられてきた様々な試みの歴史の中でハイライトともいえる3つの理論、すなわち、

- (1) ラッティンジャー・ワード理論とそのエネルギー汎関数 $\Phi[G]$ ¹⁾
 - (2) ベイム・カダノフ理論と保存近似²⁾
 - (3) ヘディン理論とGW近似³⁾
- を紹介する。なお、これらの理論に伴う方程式を

すべて詳しく導出することはとても紙幅が許さないこと、また、巷間の多体問題の教科書にそれらの方程式の説明や導出がかなり丁寧に書かれていること⁴⁾、さらに、特にヘディン理論の出発点となる一連の関係式は(その2)ですでに紹介されていることなどから、ここでは方程式の数学的導出には焦点を合わせず、むしろ、それらの方程式に辿り着いた理論哲学、あるいは、これらの理論の「ところ」の解説に意を尽くしたいと思う。

ところで、本稿全体を通して、考える系は基本的に(その2)の式(7.1)で与えられるようなハミルトニアン H で記述されるとしよう。この場合、1電子グリーン関数は $G(r, r'; i\omega_p)$ のように松原振動数の空間については対角的であるが、空間座標についてはそうではないので表記が煩雑になる。しかるに、この煩雑さは(少なくとも、ここで紹介する理論の構成に)本質的ではないので、それを避けるために、単に $G(i\omega_p)$ と書いて、これは座標空間における行列(あるいは演算子)と考えることにする。この表記法では、たとえば、 $\Sigma(i\omega_p)G(i\omega_p)$ と書けば、この (r, r') 成分が

$$\begin{aligned} & (\Sigma(i\omega_p)G(i\omega_p))_{r,r'} \\ &= \int dx \Sigma(r, x; i\omega_p) G(x, r'; i\omega_p) \end{aligned}$$

与えられる行列(演算子)であると理解された。さらに、 $i\omega_p$ 依存性を暗黙裏に仮定した省略形として、 $G(i\omega_p)$ を単に G と書く場合もあることをお断りしておく。そして、 $\text{Tr}G(i\omega_p)$ 、あるいは $\text{Tr}G$ と書けば、これは空間座標の対角成分についての積分だけでなく、松原振動数についての和(すなわち、 $T\Sigma_{\omega}$)も含むこととする。

(その1)……………Vol. 37 No. 7 (2002) pp. 455-463.

(その2)……………Vol. 38 No. 9 (2003) pp. 595-603.

§11 ラッティンジャー・ワード理論

11.1 摂動展開

今、 H を相互作用 $u(r, r')$ に依存しない部分 H_0 と依存する部分 U に分けて考えてみよう。そして、相互作用がない場合の1電子グリーン関数を $G_0(i\omega_p)$ と書くと、これを決定する方程式は(その2)の式(9.1)で $U=0$ とおけば、

$$\left(i\omega_p + \frac{1}{2m} \nabla_r^2 - v(r) \right) G_0(r, r'; i\omega_p) = \delta(r-r') \quad (11.1)$$

であることがわかるので、1電子ポテンシャル $v(r)$ (と適当な境界条件)さえ与えられれば、その正確な関数形が得られることになる。そこで、この $G_0(i\omega_p)$ から出発して、 U についての摂動展開を無限次まで正しく実行して正確な $G(i\omega_p)$ を求めようとするのは極めて自然な発想であり、そして、この摂動の各次数で現れるいろいろな項の一つ一つに対応して電子の U による散乱効果のそれぞれが記述されているはずなので、物理的にも極めて妥当な取り扱いのように思える。

さて、このアイデアを具体化する際にまず出会う困難は $G(r, r'; \tau)$ の定義に現れる電子場演算子の τ 依存性もグランドキャノニカル分布関数も共に指数関数の肩に H が入る形で規定されていることである。しかし、この困難はいわゆる相互作用表示の導入で解決される。この表示では H_0 で規定された電子場演算子の τ 依存性や熱統計重みを考えることにより、任意の個数の電子場演算子の期待値は生成消滅の各演算子1つずつの組の期待値の積(に適当な符号を付けた項)の和の形に還元できる(プロッホ・ド・オドミニシスの定理)。そして、 U の効果は変換行列 $e^{iH_0\tau - iH\tau}$ を通してのみ現れるので、これを U について展開すれば、自然に $G(r, r'; \tau)$ の形式的な摂動展開が得られる。実際、 $G(r, r'; i\omega_p)$ は

$$G(r, r'; i\omega_p) = - \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_p\tau} \left\langle T_\tau \left[\exp \left(- \int_0^\beta d\tau' U(\tau') \right) \times \psi_\sigma(r, \tau) \psi_\sigma^+(r') \right] \right\rangle_{\text{oc}} \quad (11.2)$$

のように与えられる。ここで、期待値記号の添え

字「0」は H_0 での τ 依存性や熱平均を取ることを意味し、一方、「c」は連結クラスター定理の適用(プロッホ・ド・オドミニシスの定理に従う項の還元で、 $G(r, r'; \tau)$ の元々の定義の中の電子場、 $\psi_\sigma(r, \tau)$ か $\psi_\sigma^+(r')$ 、の少なくとも一方に連結するような項だけを残すこと)を意味する。

11.2 骨格図形

そこで、式(11.2)に従って指数関数を展開して、 G を具体的に U について摂動展開をしよう。すると、ゼロ次の項 $G^{(0)}$ は G_0 であり、また、1次の項 $G^{(1)}$ は

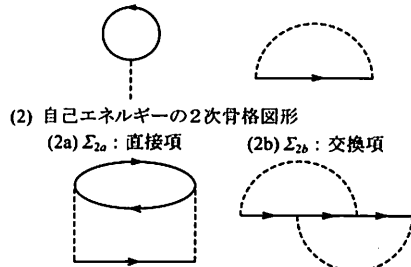
$$G^{(1)} = G_0 \Sigma_H [G_0] G_0 + G_0 \Sigma_F [G_0] G_0 \quad (11.3)$$

であることが容易にわかる。ここで、 $\Sigma_H [G_0]$ や $\Sigma_F [G_0]$ は式(7.16)や式(7.17)で定義されたハートレー項 Σ_H やフォック項 Σ_F において、 G の代わりに G_0 を用いて計算される量であり、ファインマン・ダイアグラムでは第5図の(1)で表現されるものである。

次に、2次の項 $G^{(2)}$ は第5図の(2)で定義される $\Sigma_{2a} [G_0]$ や $\Sigma_{2b} [G_0]$ を用いれば、

$$G^{(2)} = G_0 \Sigma_{2a} [G_0] G_0 + G_0 \Sigma_{2b} [G_0] G_0 + G_0 \Sigma_H [G_0 \Sigma_H [G_0] G_0] G_0 + G_0 \Sigma_H [G_0 \Sigma_F [G_0] G_0] G_0 + G_0 \Sigma_F [G_0 \Sigma_H [G_0] G_0] G_0 + G_0 \Sigma_F [G_0 \Sigma_F [G_0] G_0] G_0 + G_0 \Sigma_H [G_0] G_0 \Sigma_H [G_0] G_0 + G_0 \Sigma_H [G_0] G_0 \Sigma_F [G_0] G_0 + G_0 \Sigma_F [G_0] G_0 \Sigma_H [G_0] G_0 + G_0 \Sigma_F [G_0] G_0 \Sigma_F [G_0] G_0 \quad (11.4)$$

(1) 自己エネルギーの1次骨格図形
(1a) Σ_H : ハートレー項 (1b) Σ_F : フォック項



第5図 自己エネルギーの骨格図形: (1)は1次、(2)は2次のもの。

で与えられるが、式(11.3)を参考にし、 $\Sigma_1[G_0] \equiv \Sigma_H[G_0] + \Sigma_F[G_0]$ と書くと、式(11.4)の第3項以降の部分は

$$G_0 \Sigma_1[G^{(1)}]G_0 + G_0 \Sigma_1[G_0]G^{(1)} \quad (11.5)$$

と書き換えられることがわかるので、2次で現れる本質的に新しい項は最初の2項だけということになる。そこで、この2つを表わすダイアグラムを2次の骨格図形と呼び、その和を $\Sigma_2[G_0]$ と書こう。ちなみに、1次の骨格図形は $\Sigma_H[G_0]$ と $\Sigma_F[G_0]$ を表わすダイアグラムである。

同様の考え方をより高次の項にも適用すると、一般に、 n 次で現れる本質的に新しい項(n 次の骨格図形で表わされるもの)の和を $\Sigma_n[G_0]$ と書けば、結局、 G は“骨格” $\Sigma_n[G_0]$ において G_0 を G に入れ替えて“肉付け”した $\Sigma_n[G]$ を使って、

$$G = \sum_{n=0}^{\infty} G^{(n)} = G_0 + G_0 \sum_{n=1}^{\infty} \Sigma_n[G]G \quad (11.6)$$

で与えられることになる。なお、 $\Sigma_H[G]$ や $\Sigma_F[G]$ は Σ_H や Σ_F に他ならない。

11.3 自己エネルギーの摂動表現

ところで、式(11.1)で定義された G_0 を用いると、(その2)の式(9.1)は

$$G = G_0 + G_0(\Sigma_H + \Sigma)G \quad (11.7)$$

と同等であることがわかる。(このダイソン方程式を確かめるには、この式の左から演算子 $i\omega_p + \nabla^2/2m - v(r)$ を作用してみればよい。)そこで、式(11.6)と式(11.7)を比較すると、自己エネルギー Σ を具体的に摂動計算する際の公式

$$\Sigma = \Sigma_F[G] + \sum_{n=2}^{\infty} \Sigma_n[G] \quad (11.8)$$

が得られることになる。すなわち、(ハートレー項を除く)肉付けされた骨格図形の全体が(その2)で導入された自己エネルギーを与えることになる。

このように、ラッティンジャー・ワード理論では骨格図形という概念が中心的役割を果たし、数多ある摂動展開項の中で自己エネルギーの計算に際して考慮すべき必要十分な項の形と数を規定している。しかしながら、2次を越えると、この骨格図形の数も急激に増えてくるので、それらを具体的に与えることは高次になればなるほど困難

になる。

11.4 エネルギー汎関数

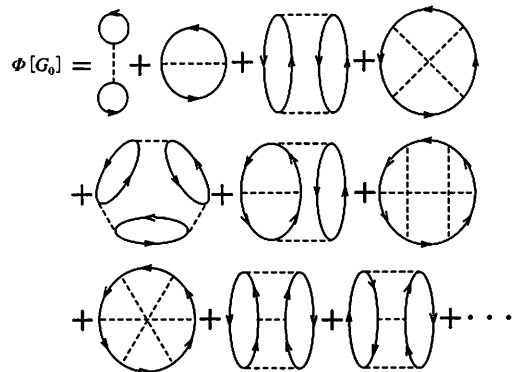
さて、この困難は骨格図形を作り出す“母汎関数”ともいべきラッティンジャー・ワードのエネルギー汎関数 $\Phi[G_0]$ を導入することによって緩和される。この $\Phi[G_0]$ も摂動次数によって分類され、その n 次の項 $\Phi_n[G_0]$ は汎関数微分

$$\frac{\delta \Phi_n[G_0]}{\delta G_0} \equiv \Sigma_n[G_0] \quad (11.9)$$

で定義される。あるいは、全く同等のことだが、

$$\Phi[G_0] = \sum_{n=1}^{\infty} \Phi_n[G_0] = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2n} \text{Tr}(G_0 \Sigma_n[G_0]) \quad (11.10)$$

で与えられる。この $\Phi[G_0]$ をファインマン・ダイアグラムで書くと、その3次までの項は第6図のようになる。なお、 $\Phi[G_0]$ を G_0 で汎関数微分するというのは、 $\Phi[G_0]$ の各項を表わすダイアグラムで G_0 線を1本取り去ることなので、たとえば、第一項を汎関数微分するとハートレー項 $\Sigma_H[G_0]$ 、第二項はフォック項 $\Sigma_F[G_0]$ 、以下、 $\Sigma_{2a}[G_0]$ 、 $\Sigma_{2b}[G_0]$ などが順に導き出せることが容易にわかる。(ちなみに、 n 次の項には $2n$ 本の G_0 線があるので、式(11.10)の係数 $1/2n$ は汎関数微分の際に相殺されることになる。)いずれにしても、3次以上の高次では、 $\Phi_n[G_0]$ のように“積分形”で項の形を与える方が“微分形”である $\Sigma_n[G_0]$ の場合よりも考えるべき項の数はずっと少なくすむというところがポイントである。



第6図 ラッティンジャー・ワードのエネルギー汎関数 $\Phi[G_0]$.

このようにして導入された $\Phi[G_0]$ において、 G_0 を G に置き換えて肉付けした $\Phi[G]$ を用いれば、自己エネルギー Σ は

$$\Sigma_H + \Sigma = \sum_{n=1}^{\infty} \Sigma_n[G] = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\delta \Phi_n[G]}{\delta G} = \frac{\delta \Phi[G]}{\delta G} \quad (11.11)$$

で与えられることになる。

11.5 熱力学ポテンシャル

ところで、この $\Phi[G]$ を導入した意義はこれだけには止まらない。実際、この $\Phi[G]$ が直接的に熱力学ポテンシャル $\Omega (\equiv -T \ln [\text{Tr} e^{-\beta H}])$ を与えるということがラッティンジャー・ワード理論の核心であるといえる。具体的にいえば、 Ω は

$$\Omega = -\text{Tr} \{ e^{i\omega_0 \tau} \ln (-G(i\omega_p)^{-1}) + G(i\omega_p) (\Sigma_H + \Sigma(i\omega_p)) \} + \Phi[G] \quad (11.12)$$

で与えられることが証明できる。

なお、式(11.7)によれば、 $\Sigma_H + \Sigma = G_0^{-1} - G^{-1}$ であるから、自己エネルギーも G の汎関数とみなせる。したがって、式(11.12)の右辺は全体としても G の汎関数となる。そこで、この汎関数 $\Omega[G]$ を G に関して汎関数微分すると、

$$\frac{\delta \Omega[G]}{\delta G} = -G \frac{\delta}{\delta G} (G^{-1} + \Sigma_H + \Sigma) - \Sigma_H - \Sigma + \frac{\delta \Phi}{\delta G} \quad (11.13)$$

となるが、式(11.7)や式(11.11)を代入すると、 $\delta \Omega[G]/\delta G = 0$ となることがわかる。すなわち、正確な G は $\Omega[G]$ の停留点を与えることになる。

もちろん、このラッティンジャー・ワード理論は無摂動系から出発した摂動級数が収束することを仮定している(あるいは、 U の関数として収束半径内の領域で考えている)ことはいうまでもない。これはフェルミ流体系の正常状態を取り扱っているといってもよい。実際、この理論を発展させて、ノジュールとラッティンジャーはランダウのフェルミ流体理論の微視的な基礎付けを行った⁵⁾。

§12 ペイム・カダノフ理論

12.1 部分和

さて、摂動論に則った前節の議論から、自己エネルギーは式(11.11)に従って計算すればよいことになる。しかしながら、 $\Phi[G]$ は無限個の骨格図形で定義されるので、力まかせに低次の項から順番に計算していくというやり方では(有限の時間内には)すべての項を取り入れることは決してできないことになる。この意味でラッティンジャー・ワード理論は厳密に正確な自己エネルギーを具体的に得るための処方箋を与えるものではないと考えられる。

そこで、この状況の打開策が求められるわけだが、その方策は2通り考えられる。ひとつはこの段階で近似理論に進もうというものであり、もうひとつは $\Phi[G]$ を正確に作り上げるアルゴリズムを考案することによって厳密理論をもう一段階、発展させよう(そして、もし近似が必要としても、その段階でしよう)というものである。後者の考え方に沿ったものとしては「自己エネルギー改訂演算子理論」があるが、それは(その4)で紹介するので、本稿ではこれ以上触れない。一方、この節で紹介するペイム・カダノフ理論は前者の考え方に沿うものなので、その観点から前者の立場をもう少し説明しよう。

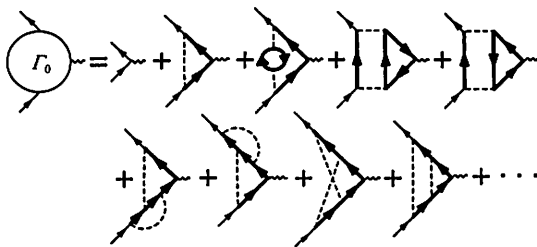
基本的に、もし $\Phi[G]$ を与える汎関数級数が絶対収束するならば、たとえ有限個数の骨格図形を計算しただけであっても十分に多数の項さえ考慮してあれば、実質上厳密な $\Phi[G]$ が得られることになる。しかし、経験によれば、物理的に興味がある多体系においては、この $\Phi[G]$ は絶対収束ではなく、条件収束する。しかも、摂動項の中には発散するものが無限個あって、それらを足し合わせて初めて収束した答えが得られるという例が決して珍しくはないという事実を知っている。逆に言えば、絶対収束する系では多体効果に特徴的な物理は含まれておらず、たとえば、 $\Phi[G] = \Sigma_H[G] + \Sigma_F[G]$ と1次近似(ハートレー・フォック近似)することが正当化されるときのように、事実上は一体問題に帰着されてしまうような場合であるとも考えられる。

したがって、多体問題としておもしろい物理を十分に精度よく記述できるには、何らかの方法で実際に無限個の項を $\Phi[G]$ の中に取り込まねばならないし、少なくとも各々が発散するような項の全ての和(部分和)は物理的にも数学的にも妥当な方法で取らねばならないことになる。そして、この「取らねばならない」を「取りさえすればよからう」と期待するのが $\Phi[G]$ の段階で近似を導入する(すなわち、厳密に正確な $\Phi[G]$ ではなく、近似的な $\Phi[G]$ で代用しようとする)際の行動哲学である。

なお、このような近似が正当かどうかは、それほど自明ではない。確かに、発散しているような各項はそれ以外の項に比べれば圧倒的な大きさであるが、それらを全部足し合わせて出てくる和の収束値が無視した項と比べてもやはり圧倒的な大きさかどうかは、無視したすべての項を評価した後でない(實際上、これはできることではない)がわからないというのが本当のところであろう。

12.2 保存近似

ところで、すべての項を正確に取り入れるのではなく、何らかの近似で部分和だけを取るという立場に立つと、そもそも、もともと欲しいのは $\Phi[G]$ そのものではなく、1電子グリーン関数 G や密度相関関数 Q_{pp} などであるので、 $\Phi[G]$ を一切考えずに、たとえば、式(11.8)で表わされる級数の中で適当な項だけを拾って自己エネルギー Σ を計算すればよからうという考え方もあり得る。同様に、3点パーテックス関数についても、(その2)の式(7.11)から出発して A_0 に対して形式的に摂動展開を行い、それから Γ_0 の摂動展開項を書き下せる(第7図には2次までの項が記されて



第7図 3点パーテックス関数 Γ_0 の摂動展開。

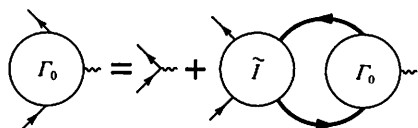
いる)ので、その級数の中から適当な項を拾ってやれば具体的に Γ_0 が計算できる。これから分極関数、そして、それを使って Q_{pp} が得られることになる。

しかしながら、このように Σ と Γ_0 について互いに無関係に近似を導入したのでは、一般に(その2)の式(7.23)で表わされるワード恒等式は成り立たず、それゆえ、電子数保存則は満たされない結果を与えてしまうことになる。これを避けるには、 Σ や Γ_0 を整合的に近似するスキームが是非とも必要になるが、その要望に見事に応えているのがペイム・カダノフ理論である。

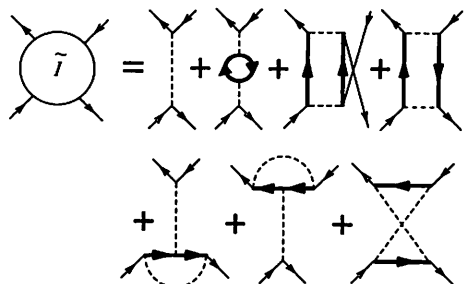
その理論によれば、第1ステップとして、ラッティンジャー・ワードのエネルギ-汎関数 $\Phi[G]$ を構成する図形のうちで自分の好きな任意の項(有限個でもよいし、あるいは、ある部分和に対応するような無限個を拾っても良いが、いずれにしても物理的に妥当で基本的にそれらの和が計算可能なもの)を取って $\Phi[G]$ の近似汎関数形を決める。そして、第2ステップとしては、そのように与えられた $\Phi[G]$ を G で汎関数微分して式(11.11)を使って自己エネルギーの汎関数形 $\Sigma[G]$ を決める。そして、その $\Sigma[G]$ と式(11.7)のダイソン方程式とを連立させて、それらの方程式を自己無撞着に解くことから G を決定する。最後の第3ステップでは、まず、自己エネルギー汎関数 $\Sigma[G]$ をさらにもう一度 G で汎関数微分して電子正孔有効相互作用 $\tilde{I}[G]$ の汎関数形を決める。すなわち、 $\tilde{I}[G]$ を

$$\tilde{I}[G] = \frac{\delta \Sigma[G]}{\delta G} = \frac{\delta^2 (\Phi[G] - \Phi_H[G])}{\delta G \delta G} \quad (12.1)$$

で具体的に与える。(なお、 $\Phi[G] - \Phi_H[G]$ というのは $\Phi[G]$ のうちからハートレー項に対応する部分 $\Phi_H[G]$ を差し引いたものである。)そして、第8図で表わされるように、その $\tilde{I}[G]$ を積分核とするペーテ・サルペータ方程式を(すでに決定されている G を使って)解くことによって3点パーテックス関数 Γ_0 が決定される。(ちなみに、 $\Phi[G] - \Phi_H[G]$ ではなく、 $\Phi[G]$ の2階汎関数微分を積分核に使ったペーテ・サルペータ方程式は A_0 を決めることになる。)この Γ_0 を使えば、分極



第8図 3点バーテックス関数 Γ_0 を決めるペーテ・サルベーター方程式.



第9図 電子正孔有効相互作用 $\tilde{I}[G]$ の2次までの項.

関数, そして, 最終的に Q_{pp} が得られる.

なお, 参考までに第9図には $\Phi[G] - \Phi_H[G]$ として, ラッティンジャー・ワードの元々の定義で2次まで正しく与えた場合(すなわち, 第6図の第2, 3, 4項を取った場合)の $\tilde{I}[G]$ が示されている. この $\tilde{I}[G]$ を第8図に代入すると, Γ_0 は, その2次まで考えれば, 第7図の結果になることが容易に見て取れよう.

このように母汎関数 $\Phi[G]$ を基準として近似を導入すれば, いかなる近似形を $\Phi[G]$ に選ぶとも, エネルギー保存則や運動量保存則などの各種保存則が自動的に満たされる形で G や Q_{pp} が得られるということを証明したことがペイム・カダノフ理論の核心である. そして, その証明に際して, 唯一必要かつ重要になったのは

$$\begin{aligned} & \frac{\delta \Sigma(r_1 \tau_1; r_2 \tau_2; [G])}{\delta G(r_1' \tau_1'; r_2' \tau_2')} \\ &= \frac{\delta^2 (\Phi[G] - \Phi_H[G])}{\delta G(r_1 \tau_1; r_2 \tau_2) \delta G(r_1' \tau_1'; r_2' \tau_2')} \\ &= \frac{\delta \Sigma(r_1' \tau_1'; r_2' \tau_2'; [G])}{\delta G(r_1 \tau_1; r_2 \tau_2)} \quad (12.2) \end{aligned}$$

という関係式(“渦なし場”と喩えられるような条件)である. そして, このペイム・カダノフのスキームに従う近似手法は「保存近似法」と呼ばれる. もちろん, いかなる $\Phi[G]$ も自由に選べる

とはいえ, 物理的に妥当なものでない限り, 各種保存則を満たしているというだけでは十分に精度のある答えが得られないことはいうまでもない. 実際, ハートレー・フォック近似はこの意味で常に保存近似であるが, それは一体近似が妥当な系でのみ有効なものである.

12.3 局所最小条件

ところで, $\Phi[G]$ を近似的に与える場合, 熱力学ポテンシャル Ω も式(11.12)を使って近似的に計算・評価することができる. そして, 式(11.9)によって自己エネルギーと G との関係をつけているので, この近似熱力学ポテンシャルも G の汎関数と見なせる. そこで, この $\Omega[G]$ の汎関数としての性格を少し見ておこう.

まず, $\Omega[G]$ を G で汎関数微分をすると, $\Phi[G]$ の違いがあるとはいえ, 式(11.13)とちょうど同じ結果が得られる. この式の右辺に式(11.11)を用いると, やはり, $\delta \Omega[G] / \delta G = 0$ が得られるので, この近似スキームにおいても, 決定される G は近似熱力学ポテンシャル $\Omega[G]$ の停留点であることがわかる.

この停留点 G が(少なくとも $G \rightarrow G + \delta G$ という“局所変化”に対しては)最小点を与えるかどうかを見るためには, G についての汎関数微分をもう一度取って, その符号を調べればよい. その汎関数微分の際に, $\Sigma_H + \Sigma = G_0^{-1} - G^{-1}$ に注意すると,

$$\frac{\delta^2 \Omega[G]}{\delta G \delta G} = \frac{\delta(G^{-1})}{\delta G} + \frac{\delta^2 \Phi}{\delta G \delta G} \quad (12.3)$$

が得られるが, $GG^{-1} = 1$ から導かれる $G(\delta(G^{-1})/\delta G)G = -1$ という関係式, および, A_0 に対するペーテ・サルベーター方程式

$$A_0 = 1 + G(\delta^2 \Phi[G] / \delta G \delta G) G A_0$$

を書き直した

$$A_0^{-1} = 1 - G(\delta^2 \Phi[G] / \delta G \delta G) G$$

の関係式を使うと,

$$G \frac{\delta^2 \Omega[G]}{\delta G \delta G} G = -A_0^{-1} \quad (12.4)$$

が得られる. あるいは, この式の両側から G^{-1} を作用させて, (その2)の式(8.3)を考慮して密度相関関数 Q_{pp} を用いて書き換えると,

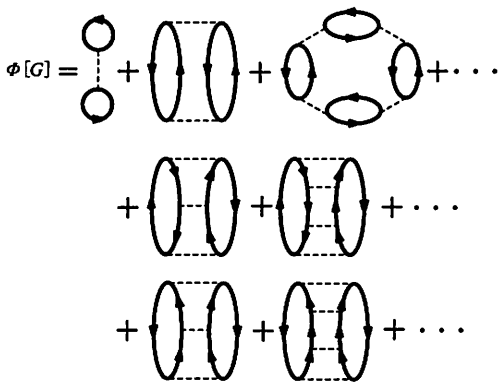
$$\text{Tr} \left\{ \delta G \frac{\delta^2 \Omega[G]}{\delta G \delta G} \delta G \right\} = -\text{Tr} \{ \delta G Q_{pp}^{-1} \delta G \} \quad (12.5)$$

が得られる。この結果から、任意の変分 δG に対して系が安定であるためには、 Q_{pp} は常にゼロ以下(つまり、 Q_{pp} を行列と考えれば、そのすべての固有値がゼロ以下)でないといけなことがわかる。物理的には、(少なくとも、考えている近似の範囲では)電荷揺らぎに対する系の安定性を要求していることになる。

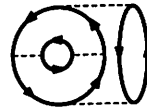
12.4 揺らぎ交換近似

このベイム・カダノフのスキームをハートレー・フォック近似の段階を越えて実行するには、電子計算機環境の格段の進歩が必要であった。実際、ハバード模型のように、第一原理のハミルトニアンと比べればかなり簡単化されて、デルタ関数型の短距離極限の電子間斥力が働く(このとき、スピン平行の電子間にはパウリ原理から相互作用は働かず、スピン反平行の電子間にも、斥力効果を考えればよい)ような場合ですら、計算が実行されたのはベイム・カダノフの提案以来、4半世紀以上を経てからのことであった⁹⁾。

第10図には、その計算の $\phi[G]$ に含まれている項がダイアグラムの形で記されている。これはハートレー項の寄与の他に電荷揺らぎとスピンの縦揺らぎを考慮する第1行の部分、スピンの横揺らぎを考慮する第2行の部分、そして、クーバー対の超伝導揺らぎを考慮する第3行の部分



第10図 揺らぎ交換近似における $\phi[G]$.



第11図
揺らぎ交換近似には
含まれない項の例。

から成り立っている。このように、代表的な揺らぎをすべて取り込んでいるので、「揺らぎ交換(Fluctuation Exchange: FLEX)近似」と呼ばれている。なお、ハバード模型ではスピンが反平行の電子間には斥力が働かないので、(第8図を参照すればわかるように)この FLEX 近似でも3次までは正確な $\phi[G]$ と全く同じである。しかし、4次以降では、たとえば、第11図に示したような項をはじめとして、いろいろな揺らぎが干渉する効果などは一切含まれないことになる。

ここ十数年間、この FLEX 近似による計算が世界中で広範囲に行われ、磁性や超伝導の発現機構を議論する研究が枚挙に暇がないほどに盛んに行われている。(日本国内の研究に限ったとしても、たとえば、インターネットのサーチエンジンで「FLEX 近似」を検索すると、数十のヒットが得られるほどに多くの研究室が関与していることがわかる。)ただ、今のところ、計算機的能力上、FLEX 近似の実行はハバード模型(とその簡単な拡張型)に限られている。この制限も理由の一つとなつて、筆者はこの近似がどれ程真実を捉えているのか、ハバード模型の妥当性も含めて、未だはっきりとは掴み切れていないというのが正直なところである。

§13 ヘディン理論

13.1 有効電子間相互作用による展開

これまでは裸の電子間相互作用 U をパラメータとして摂動展開をするという立場での理論を紹介してきた。確かに、ラッティンジャー・ワード理論のように、全ての項を正確に取り込むという立場では(結局、どのように考え直しても最終的には同じことになるので) U での展開ということでは、近似計算で(いくつかの)部分和を取るという立場では、物理的に最もふさわしい展開パラメータというものは U であるとは限らない。

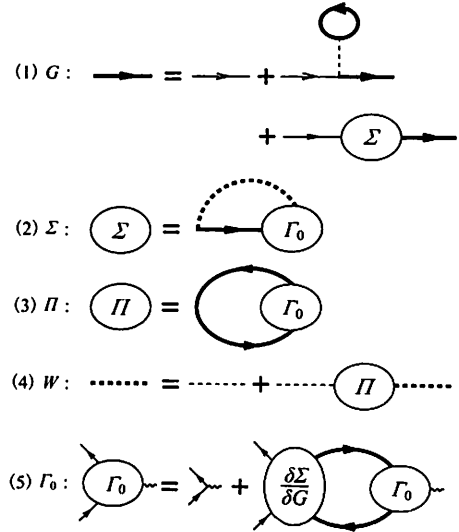
実際、 $\Phi[G]$ の構成で部分和を取るといった数学的操作は無窮級数の中での項の並べ替えを意味し、その並べ替えというのは物理的には電子間に実効的に働く相互作用は U ではなく、ある有効相互作用 \tilde{U} であると考えてのものと解釈できる。そして、この \tilde{U} での展開は、それが物理的に正しいものであれば、数学的には U でのそれよりもずっと速く収束するに違いないと信じられている。

この節で紹介しようとするヘディン理論では、 U が長距離クーロン斥力である場合を想定して、 U での展開ではなく、遮蔽されたクーロン斥力、すなわち、(その2)の式(8.4)、あるいは、式(8.9)で与えられた W を \tilde{U} と考えて、それによる摂動展開をしようというものである。大まかにいえば、摂動パラメータとして無次元化された電子密度パラメータ r_i (これはボーア半径を単位とした伝導電子間の平均距離を表すものと考えて良い) を用いるような U での展開ではなく、 $r_i/(1+r_i)$ のような展開パラメータになる W での展開に変換することになる。前者の場合には、代表的な金属密度領域 ($1.9 < r_i < 5.6$) では収束が大変遅い(もっと正確に言えば、部分和を取らない限り収束しない)が、後者では $0.66 < r_i/(1+r_i) < 0.85$ なので、大幅に改善される(たとえ有限個の摂動項しか計算しないとしても、物理的に意味のある答えが得られるかもしれない)と期待できるわけである。

13.2 ヘディンの方程式群

さて、そこで、 U から W への摂動展開パラメータの変換をどのように定式化するかということが問題になる。この課題に対して、ヘディンはラッティンジャー・ワードのエネルギ-汎関数 $\Phi[G]$ を基礎にするというような摂動展開の思考をいったんは捨てて、次のような二つの段階からなる戦略を考えた。

まず、その第1段階では、(その2)で導いたように(もっとも、そこでの導出法の詳細はヘディンのオリジナルのものとは少々異なるが)、1電子グリーン関数 G の定義から始めて非摂動論的手法で直接的に G や自己エネルギー Σ 、分極関数 Π 、有効電子間相互作用 W 、そして、3点バネックス関数 Γ_0 の間に厳密に成り立つ一連の



第12図

ヘディンの方程式群のダイアグラムによる表記。

関数関係を確立した。第12図には、これらの関数関係をダイアグラムで表現したものが一括して示されている。このうち、第一式は式(9.1)、あるいは、式(11.7)のダイソン方程式を表わしており、第2式は式(9.2)、第3式は式(8.7)に対応している。そして、第4式は $(W(r, r'; i\omega_q))$ は r と r' の入れ替えや $i\omega_q \leftrightarrow i\omega_q$ に対して対称であることに注意すれば、ちょうど、式(8.9)であることがわかる。また、第5式は(その2)でははっきりとは導かれなかったが、第8図において \tilde{I} に式(12.1)を代入したものである。

この5つの方程式は $G, \Sigma, \Pi, W, \Gamma_0$ の5つの物理量のそれぞれが厳密に正確な量であるときに、お互いに自己無撞着に満たすべき一群の関係式を与えている。しかも、この5つの量の間で閉じた関係になっており、その他の物理量が介在しないことが本質的に重要なことである。

13.3 汎関数の逐次展開

次に、その一連の方程式から具体的に Σ を得るためのプロセスを与えることが第2段階の問題となるが、その際の鍵になるアイデアは5つの物理量を全て同等とは見なさないで、 G と W の2つは主たる“変数”と考えて、残る Σ, Π, Γ_0 はこれらの汎関数と見なすことである。

このアイデアの背景は次のように説明できる。元々、素朴に摂動展開した場合、すべての項は G_0 と U を用いて計算されることになるが、たとえば、 G_0 についていえば、前節や前々節で述べたように、 G_0 よりむしろ、ダイソン方程式で結びつけられる G を主役にして、あらゆる物理量は(そのダイソン方程式に現れる自己エネルギーも含めて) G の汎関数と見なされる。その理由は、多電子系の中では G_0 で表わされるような“裸”の電子が存在するのではなく、 G で表現される“衣”を着た電子が実態であると認識されるからである。そこで、同様に、相互作用も“裸”の U ではなくて、第12図の第(4)式で U と結びつけられる有効電子間相互作用 W を中心と考え、 G と並んで主役としようということである。

そこで、3つの汎関数 $\Sigma[G, W]$, $\Pi[G, W]$, $\Gamma_0[G, W]$ を決定することが課題になり、それらを与える方程式は基本的に第12図の第(2), (3), (5)式のはずである。しかしながら、このままでは具体的な汎関数形は出てこないで、とりあえず、 W は良い展開パラメータになりうると仮定して、それぞれの汎関数形の W についての展開形を求めようという立場がヘディン理論の第2段階の要である。

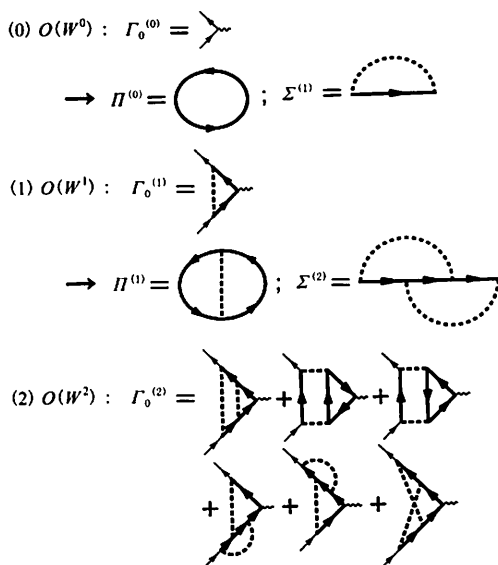
さて、その展開形は逐次近似法を用いれば、(収束性などは敢えて問題としなければ)形式上、組織的に得られることになる。まず、 $\Gamma_0[G, W]$ に対して、第12図の第(5)式の右辺第1項のみを考慮すると、第ゼロ次近似として、 $\Gamma_0^{(0)}[G]=1$ が得られる。これを第12図の第(3)式に代入すれば、分極関数 $\Pi[G, W]$ の第ゼロ次近似として、 $\Pi^{(0)}[G]=-GG$ が得られ、また、第12図の第(2)式から自己エネルギー $\Sigma[G, W]$ の第1次近似として、 $\Sigma^{(1)}[G, W]=-GW$ が得られる。これらの結果は第13図において、3点パーテックス関数のゼロ次近似の欄にダイアグラムで表現されている。

同様に、 $\Gamma_0[G, W]$ の第1次近似を求めるには、第12図の第(5)式の右辺第2項において、 $\Gamma_0^{(0)}$, および、 $\delta\Sigma^{(1)}[G, W]/\delta G$ を代入すると、第13図(1)で表わされるような $\Gamma_0^{(1)}[G, W]$ が得られることになる。そして、これを使うとその図に示されているような $\Pi^{(1)}[G, W]$ や $\Sigma^{(2)}[G, W]$ が求

められる。以下、同じように逐次近似を進めていけばよいが、2次以上では考えるべき項の数は急激に増加する。たとえば、第13図(2)にあるように、2次では $\Gamma_0^{(2)}[G, W]$ は6項からなり、それゆえ、 $\Pi^{(2)}[G, W]$ や $\Sigma^{(3)}[G, W]$ も6項からなる。さらに、3次のパーテックス関数 $\Gamma_0^{(3)}[G, W]$ を表わす項数は49個にも上る。

13.4 GW 近似

このように、自己エネルギーの汎関数展開形 $\Sigma[G, W]=\sum_{n=1}^{\infty}\Sigma^{(n)}[G, W]$ が具体的に与えられたが、そもそも、この展開理論が有用であるためには、はじめの数項、極端にいえば、第1項だけを取ったとしても定性的にはもちろんのこと、定量的にも良い結果を与えることが絶対条件になる。実際、もし、この W についての展開でも無限個の和(すなわち、“部分和”)が必要になるといことは、はじめに設定した W が物理的な実態に即していないか、あるいは、そもそも、有効電子間相互作用という概念が成立していないかの場合であって、そのときには、このような展開理論よりもむしろ元々の U の展開に戻って考えた直した方が素直なやり方といえる。



第13図
2変数汎関数 $\Gamma_0[G, W]$, $\Pi[G, W]$, および、 $\Sigma[G, W]$ の W を展開パラメータとする逐次展開。

いずれにしても、具体的な計算では、まず、 $\Sigma[G, W] = \Sigma^{(1)}[G, W] = -GW$ という近似から始めるのは当然であろう。なお、この汎関数形が G と W の積なので、この段階での近似は「GW 近似」と呼ばれている。そして、 W 自体は $\Pi^{(0)}[G]$ を用いて $W = u / (1 + u\Pi^{(0)}[G])$ で与えられることになるので、自己エネルギーは全体として G だけの汎関数ということになり、ダイソン方程式と連立すれば、具体的に Σ が決定されることになる。

物理的には、第13図(0)に表わされている $\Sigma^{(1)}$ のダイアグラムと第5図(1b)のフォック項 Σ_F のそれを比べれば簡単にわかるように、GW 近似というのはハートレー・フォック近似の一般化で、裸の相互作用 U ではなく、動的に遮蔽された有効相互作用 W を使って(相関効果を含む)交換項を考えることである。そして、これによって、たとえば、ハートレー・フォック近似を単純に金属に適用した場合の非物理的な困難点(フェルミ準位での有効質量がゼロになることなど)が回避できるのである。

しかしながら、この近似は保存近似ではないので、各種の保存則が満たされない。とりわけ、パーテックス補正を全く無視しながらも自己エネルギー補正は考慮するので、(その2)の式(7.23)に示されているワード恒等式が満足されず、それゆえ、電子数が保存されないという根本的な欠陥を持っている。また、分極関数を $\Pi^{(0)}$ で近似しているが、これは静的長波長極限での圧縮率総和則を全く満たさない。そのため、これから導かれる密度相関関数 Q_{pp} もあまりよい結果は期待しない方がよい。

ところで、近年、第一原理のハミルトニアンに直接立脚しつつ、このヘディン理論、とくに、そのGW 近似を応用した数値計算が大変盛んになってきている⁷⁾。ただ、実際の計算では、現在までのところ、 G を自己無撞着には決めずに G_0 のままで $\Pi^{(0)}$ や $\Sigma^{(1)}$ を評価した場合が殆どである。もっとも、これは保存近似ではないので、自己無撞着な計算をわざわざ実行して G_0 を G に入れ替えても大きなメリットはないし、むしろ、実験との比較でこの近似の妥当性を議論する場合には、経験的な知恵として、 G_0 を決めている1電子ポ

テンシャル $v(r)$ の賢い選択がポイントになっている。

§14 (その3)のさいごに

物性理論の主要な研究テーマの一つは多電子系の物理であるが、その基底状態だけでなく励起状態も大規模数値計算に重きを置きながら研究しているコミュニティは、現在、「強相関系」というキーワードを中心に考えているものと「第一原理計算」というキーワードで括られるものに大きく分けられるようである。そして、前者ではモデル・ハミルトニアンに対して FLEX 近似が、後者では第一原理ハミルトニアンに対して GW 近似が普通的手段になってきている。

確かに、1990年代以前では、これらの近似手法はいわゆるトイ・モデルを越えて適用不可能なものであったので、最近の理論の進歩は著しいといえよう。しかしながら、本稿でも指摘したように、そのいずれもが「最終理論」にはほど遠く、現在の計算機リソースと相談しながらの中途半端なものというのが筆者の偽らざる感想である。そして、来るべき「最終理論」はこれら2つのコミュニティに共通の理論手段を与えるはずのものであると認識している。

〔参考文献〕

- 1) J. M. Luttinger and J. C. Ward: Phys. Rev. **118** (1960) 1417.
- 2) G. Baym and L. P. Kadanoff: Phys. Rev. **124** (1961) 287; G. Baym: Phys. Rev. **127** (1961) 1391.
- 3) L. Hedin: Phys. Rev. **139** (1965) A796.
- 4) (1)や(2)の理論については、拙著:「多体問題」(朝倉物理学大系9巻, 朝倉, 1999年)の第3章3.3節でも触れられている。なお、この教科書での自己エネルギーはハートレー部分 Σ_H も含むものとして定義されており、本解説の自己エネルギーはそこでの Σ に対応することに注意されたい。
- 5) P. Nozières and J. M. Luttinger: Phys. Rev. **127** (1962) 1423; J. M. Luttinger and P. Nozières: Phys. Rev. **127** (1962) 1431.
- 6) N. E. Bickers, D. J. Scalapino, and S. R. White: Phys. Rev. Lett. **62** (1989) 961; N. E. Bickers and S. R. White: Phys. Rev. B **43** (1991) 8044.
- 7) GW 近似に対する最近のレビューとしては、F. Aryasetiawan and O. Gunnarsson: Rep. Prog. Phys. **61** (1998) 237; W. G. Aulbur, L. Jönsson, and J. W. Wilkins: in *Solid State Physics*, edited by H. Ehrenreich and F. Spaepen (Academic, New York, 2000) Vol. 54, p. 1 などがある。